



TITLE:

表面電子に対する光学的格子振動  
の効果(「表面電子系の理論」報告  
,基研短期研究会)

AUTHOR(S):

松浦, 満

---

CITATION:

松浦, 満. 表面電子に対する光学的格子振動の効果(「表面電子系の理論」報告,基研短期研究会). 物性研究 1976, 26(3): C88-C90

ISSUE DATE:

1976-06-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89178>

RIGHT:

の  $F^* = 230 \text{ V/cm}$ ,  $\mu = 1.76 \times 10^7 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  と良い一致を示す。

### 参 考 文 献

- 1) C. C. Grimes and G. Adams, Phys. Rev. Letters, **36** (1976) 145.
- 2) M. W. Cole, Phys. Rev., **B2** (1970) 4239.
- 3) V. B. Shikiv and Yu. P. Monarka, J. Low Temp. Phys., **16** (1974) 193.
- 4) G. D. Gaspari and F. Bridges, preprint.
- 5) 正しい表式は (2) で与えられるが,  $^4\text{He}$  の場合第 3 項は小さく無視できる。  
MOS では第 3 項を含める事が必要となる。

## 表面電子に対する光学的格子振動の効果

山口大・工 松 浦 満

イオン結晶の表面近くに存在する電子は、表面光学型フォノンと強く相互作用し、電子は表面ポーラロンと呼ぶ事が出来る。ここでは (1) この問題に対する表面光学型フォノンと共に、バルク光学型フォノンをも考慮する定式化を行い、(2) その結果を使って、イオン性半導体中の intrinsic な表面準位の電子に対するポーラロン効果を半定量的にみつもった。

モデルとして電子のハミルトニアンは表面に平行な方向では有効質量を持った自由電子を仮定し、垂直な方向では表面の効果がポテンシャル  $V(z)$  で表わせるとする。表面に平行な運動量

$$P_{\parallel} = p_{\parallel} + \sum_q \hbar q s_q^+ s_q + \sum_k \hbar k_{\parallel} b_k^+ b_k$$

を定義すると、 $P_{\parallel}$  はハミルトニアン  $H$  と可換である。従って  $P_{\parallel}$  は表面ポーラロンの運動量とみなせる。ここで  $p_{\parallel}$  は電子の運動量オペレーターの表面に平行な成分を表わし、 $s_q^+$  と  $s_q$  は波数  $q$  を持つ表面フォノンの生成及び消滅演算子、 $b_k^+$  と  $b_k$  は波数

$k$  を持つバルクフォノンの生成及び消滅演算子である。ハミルトニアン  $H$  に対し  $p_{//}$  を消すユニタリー変換と表面に垂直方向の状態  $|n\rangle$  に関し、断熱近似をとると問題は 2次元で2つのモードと相互作用をしているポーラロンの問題に帰着し、その時ハミルトニアンは次の形を持つ。

$$\begin{aligned}\langle n|H|n\rangle &= \langle n|\frac{p_z^2}{2m_{\perp}} + V(z)|n\rangle + \bar{H} \\ \bar{H} &= \frac{1}{2\bar{m}} (P_{//} - \sum_q \hbar q s_q^+ s_q - \sum_k \hbar k_{//} b_k^+ b_k)^2 \\ &\quad + \hbar \omega_s \sum_q s_q^+ s_q + \sum_q \bar{v}_q (s_q^+ + s_q) \\ &\quad + \hbar \omega_b \sum_k b_k^+ b_k + \sum_k \bar{w}_k (b_k^+ + b_k)\end{aligned}$$

ここで  $1/\bar{m} = \langle n|1/m_{//}|n\rangle$ 。このハミルトニアン  $\bar{H}$  に対し、通常のポーラロンの Lee-Low-Pines 近似及び Haga 近似に対応した計算をする事により、 $P_{//}$  の小さな時のエネルギーとして、次の結果を得る。

$$E_{LLP} = \delta E_s + \delta E_b + \frac{P_{//}^2}{2m_{LLP}^*}$$

ここで、

$$\delta E_s = - \sum_q \frac{(\bar{v}_q)^2}{\hbar \omega_s + \frac{\hbar^2 q^2}{2\bar{m}}}, \quad \delta E_b = - \sum_k \frac{(\bar{w}_k)^2}{\hbar \omega_b + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2\bar{m}}},$$

$$m_{LLP}^* = \bar{m} (1 + 2x_s + 2x_b),$$

$$x_s = \frac{1}{P^2} \sum_q \frac{(\bar{v}_q)^2 \left( \frac{\hbar q \cdot P_{//}}{m} \right)^2}{\left( \hbar \omega_s + \frac{\hbar^2 q^2}{2\bar{m}} \right)^3}, \quad x_b = \frac{1}{P^2} \sum_k \frac{(\bar{w}_k)^2 \left( \frac{\hbar k_{//} \cdot P_{//}}{m} \right)^2}{\left( \hbar \omega_b + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2\bar{m}} \right)^3}$$

及び

$$E_H = \delta E_s + \delta E_b + \frac{P_{//}^2}{2m_H^*}$$

ここで、

$$m_H^* = \bar{m} \frac{1 + x_s + x_b + x_s x_b}{1 - x_s - x_b - 3x_s x_b}$$

上の結果をイオン性半導体の典型的な物質である Cds 及び GaAs に適用した。表面ポテンシャルとして  $V(z) = E_s^0 e^{-dz}$  for  $z \geq 0$  及び  $\infty$  for  $z < 0$  と取り、このうち、 $E_s^0$  は計算された表面準位が実験値と合う様に決め、 $d$  は結晶の格子定数を取った（結果は  $d$  にあまり依存しない）。対応する電子の波動関数として  $(\beta^3/2)^{1/2} z \exp(-\beta z/2)$  を使い（ $\beta$  は変分パラメーター）、又、表面電子の質量としてはバルク伝導電子の質量  $m_b$  を使った（ $m_{\perp} = m_{//} = \bar{m} = m_b$ ）。数値結果は、 $\delta E$  は  $-0.035$  (eV) (Cds) 及び  $-0.005$  (eV) (GaAs),  $m_H^*/\bar{m}$  は  $1.31$  (Cds) 及び  $1.04$  (GaAs) である。 $\delta E_s$  と  $\delta E_b$  及び  $x_s$  と  $x_b$  の大きさの比をみると、電子に対して表面フォノンがバルクフォノンより強く効果を与えるが、バルクフォノンの効果も無視出来ない事がわかる（特に Cds では  $\delta E_s/\delta E_b \sim x_s/x_b \sim 0.3$  である）。又、 $\delta E$  及び  $m_H^*/\bar{m}$  はバルクの伝導電子に対するポーラロン効果による値（例えば Haga 近似による Cds での値は  $\delta E \sim -0.020$  (eV),  $m^*/m_b \sim 1.1$ ）より大きい。これは非常に表面近くにある電子と表面フォノンの相互作用が、バルク伝導電子とバルクフォノンとの相互作用にくらべて強い性格を持つ事を示している。